УДК 517.8; 530.1

ВТОРОЙ КЛАСС ТОЧНО РЕШАЕМЫХ ЗАДАЧ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Гришкан Ю.С.

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, e-mail: ugrish@yandex.ru

Показано, что можно построить точные решения уравнения Шрёдингера, обладающие определённым типом конформной симметрии. Эти решения удобно находить, как решения присоединённого к уравнению Шрёдингера уравнения Риккати. Выделен класс II точных решений. Найдены точные решения некоторых потенциалов, входящих в этот класс, в частности, для потенциала пространсвенного линейного гармонического осциллятора с вращением и для кулоновского потенциала в поле центробежных сил.

Ключевые слова: групповые методы, классы точных решений, уравнение Шрёдингера

SECOND CLASS OF EXACTLY SOLVABLE TASKS QANTUM MECAHANICS STATIONARY SCHRODINGER EUQATION

Grishkan Y.S.

Southern Federal University, Rostov-on-Don, e-mail: ugrish@yandex.ru

It is shown how to find some exact solutions of Schrodinger equation with some type of conformal symmetry. To find these solutions, it may be used an attached Riccati equation. It is selected the II class of its solutions. The exact solutions for II class is find. In particular, it is find solutions for linear harmonic oscillator with rotation term and Coulomb potential with centrifugal force.

Keywords: group methods, classes of exact solutions, Schrodinger equation

Поиск точных решений стационарного уравнения Шрёдингера является пограничной областью между физикой и математикой. Как правило, физикам известен очень ограниченный набор таких решений. Однако, такие решения могут быть найдены для многих систем электромагнитного и сильного взаимодействий, таких как молекулы, атомы и кварконии. Для поиска этих решений выделим несколько классов потенциалов, обладающих конформной симметрией, и найдём решения для этих классов. Затем, приспособим найденные решения к конкретным 2-х и 3-х параметрическим потенциалам квантовых систем, хорошо известных в физике электромагнитного и сильного взаимодействий.

Как известно [1], уравнение Шрёдингера в координатном представлении

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+U(\vec{r})\right]\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}) \qquad (1)$$

после введения цепочки лестничных пары лестничных операторов

$$\hat{a}_n=\hat{p}+if_n(x);\hat{a}_n^{+}=\hat{p}-if_n(x);$$

сводится к нелинейному операторному уравнению Риккати для операторной функции $f_n=f_n(x)$ в координатном представлении:

$$\frac{df_n}{dx}+f_n^2=U_n(x)-E_n. \qquad (2)$$

Цепочка операторов $\{E_n\}$ образует спектр оператора Гамильтона

$$H=H_0=\frac{\hat{p}^2}{2m}+U(\vec{r}).$$

Для простоты, не будем писать шляп над операторами.

Цепочка операторов $\{H_n\}$ факторизуется

$$H_n=a_n^{+}a_n+E_n.$$

Для нахождения спектра E_n рассмотрим одномерное и радиально-симметричное движение $f_n=f_n(q)$.

Сведём радиально – симметричное движение к одномерному. Это делается с помощью перехода безразмерной координате $\rho=\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}r$ [2]. В полный потенциал $U(\rho)$ необходимо добавить центробежный член

$$U_l(\rho)=U(\rho)+\frac{l(l+1)}{\rho^2}.$$

Несложно показать, что радиальная часть волновой функции нормирована на единицу

$$\tilde{P}(\rho)=\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/4}P(\rho),$$

$$P(\rho)=R(r)r,\ \int\tilde{P}^2(\rho)d\rho=1.$$

Обозначив $\rho = q$, введём класс II точно решаемых задач для потенциалов

$$U_0(q) = A_0 Q^{2m} + \frac{B_0}{Q^{2m}} + \mathrm{U}_0, \qquad (3)$$

где $m = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$, $Q = Q(x)$ – некоторая функциональная форма, которую необходимо задать.

Будем искать точное решение уравнения (2) в виде

$$f_n = \alpha_n Q^m + \frac{\beta_n}{Q^m},$$

$$\frac{dQ}{dq} = aQ^{m+1} + cQ^{-m+1}, \qquad (4)$$

α_n, β_n – цепочки функций, подлежащих определению, a, c – известные константы.

Поставленная задача требует нахождения цепочек α_n, β_n, E_n, в виде функций констант A_0, B_0, U_0, a, c.

Собирая коэффициенты при одинаковых степенях Q в уравнениях (3)-(4), получим следующие уравнения для неизвестных α_0, β_0, E_0:

$$\alpha_0^2 + ma\alpha_0 = A_0$$

$$\beta_0^2 - \beta_0 mc = B_0$$

$$E_0 = U_0 - \alpha_0(2\beta_0 + mc) + \beta_0 ma \qquad (5)$$

Операторы цепочки $\{H_n\}$ находятся по рекуррентной формуле

$$H_n = H_{n-1} + [a_{n-1,}^{+} a_{n-1}] \qquad (6)$$

Построим первый оператор цепочки (2)

$$H_1 = a_1^{+} a_1 + E_1.$$

Собирая коэффициенты при одинаковых степенях Q, построим систему уравнений для коэффициентов, подлежащих определению.

$$\alpha_1^2 + ma\alpha_1 = A_1$$

$$\beta_1^2 - \beta_1 mc = B_1$$

$$E_1 = U_1 - \alpha_1(2\beta_1 + mc) + \beta_1 ma \qquad (7)$$

где

$$U_1 = U_0 - 2\beta_0 mc, \quad A_1 = A_0 - 2\alpha_0 ma,$$

$$B_1 = B_0 + 2\beta_0 mc$$

Для уравнений цепочки с индексом n получим

$$\alpha_n^2 + ma\alpha_n = A_n$$

$$\beta_n^2 - \beta_n mc = B_n$$

$$E_n = U_n - \alpha_n(2\beta_n + mc) + \beta_n ma \qquad (8)$$

Из (8) следуют тогда решения

$$E_n = U_n - mc\alpha_n - 2\alpha_n\beta_n + am\beta_n, \qquad (9)$$

где

$$U_n = U_0 - 2mc\sum_{k=0}^{n-1}\alpha_k + 2ma\sum_{k=0}^{n-1}\beta_k$$

$$A_n = A_0 - 2ma\sum_{k=0}^{n-1}\alpha_k \qquad (10)$$

$$B_n = B_0 + 2mc\sum_{k=0}^{n-1}\alpha_k$$

Решение уравнений (8), (9) даёт

$$\alpha_k = \frac{1}{2}s_{k1}\tilde{a} - \frac{1}{2}\sum_{l=0}^{k-1}(2l+1)ma \qquad (11)$$

где знак $s_k = \pm 1, s_k^2 = 1$ устанавливается с учётом условий максимальности уровней энергии при факторизации,

$$\tilde{a} = \sqrt{(ma)^2 + 4A_0}. \qquad (12)$$

Также из (8), (9) следует

$$\beta_k = \frac{1}{2}mc + s_{k2}\sqrt{(mc)^2 + 4B_n} \qquad (13)$$

$$\beta_k = \frac{1}{2}s_{k2}\tilde{c} + \frac{1}{2}\left(\sum_{l=0}^{k-1}2l+1\right), \qquad (14)$$

где

$$\tilde{c} = \sqrt{(mc)^2 + 4A_0} \qquad (15)$$

Единый спектр существует при условиях на знаки

$$s_{k1} = s_1, s_{k2} = s_2 \qquad (16)$$

Теперь можно получить решения для α_n, β_n выражения

$$\alpha_n = \frac{1}{2}s_1\tilde{a} - \frac{1}{2}(2n+1)ma \qquad (17)$$

$$\beta_n = \frac{1}{2}s_2\tilde{c} + \frac{1}{2}(2n+1)mc \qquad (18)$$

С помощью (11), (14) получаем аналогичные выражения для сумм этих коэффициентов

$$\sum_{k=0}^{n-1}\alpha_k = \frac{1}{2}s_1\tilde{a}n - \frac{n^2}{2}ma \qquad (19)$$

$$\sum_{k=0}^{n-1}\beta_n = \frac{1}{2}s_2\tilde{c}n + \frac{1}{2}mcn^2 \qquad (20)$$

После подстановки (19), (20) в (9) получим окончательное выражение для спектра системы

$$E_n = U_0 - s_1 s_2 \tilde{a}\tilde{c} + 2acm^2 n^2 +$$
$$+ 2(acm^2 + s_2 \tilde{c} ma - s_1 \tilde{a} mc)\left(n + \frac{1}{2}\right) +$$
$$+ 2m^2 ac\left(n + \frac{1}{2}\right)^2. \quad (21)$$

Рассмотрим две квантовые системы, относящиеся к классу II.

II-1. Кулоновский центробежный потенциал [2]

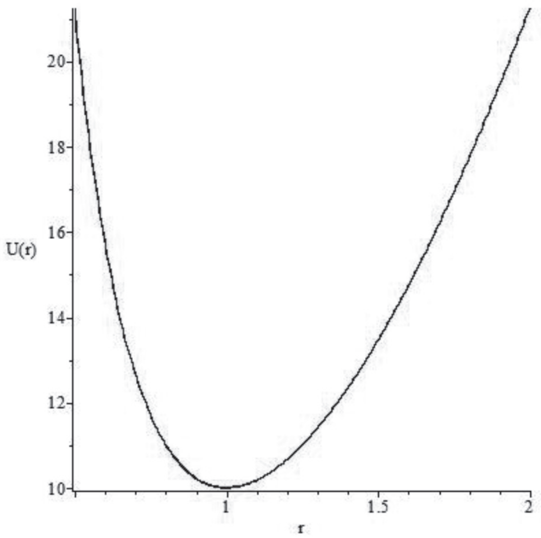
Пусть

$$m = 1,\ A_0 = A_0,\ B_0 = B_0,\ a = 0,\ c = 1. \quad (22)$$

Тогда

$$Q = \rho.\ U(r) = \frac{B_{0\rho}}{\rho^2} + A_{0\rho}\rho^2 - \frac{l(l+1)}{2m\rho^2}. \quad (23)$$

Этот потенциал изображён на рисунке при $A_0 = 5$, $B_0 = 5$, $l = 0$.



Кулоновский центробежный потенциал при $A_{0\rho} = B_{0\rho} = 5$, $l = 0$

Перейдём от безразмерных единиц расстояния ρ к физическим. Тогда

$$B_{0\rho} = \frac{B_0\hbar^2}{2m},\quad A_{0\rho} = \frac{A_0 2m}{\hbar^2}.$$

$$\tilde{a} = 2\sqrt{A_{0\rho}} = \hbar\sqrt{\frac{A_0}{2m}},$$

$$\tilde{c} = \sqrt{1 + 4B_{0\rho}} = \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{8mB_0}{\hbar^2}}. \quad (24)$$

Спектр потенциала имеет вид

$$E_{nr,l} = \hbar\sqrt{\frac{A_0}{2m}}\left[4n + 2 + \sqrt{(2l+1)^2 + \frac{8mB_0}{\hbar^2}}\right]. \quad (25)$$

Последнее выражение совпадает с приведённым в [2] результатом.

II-1-1. Пусть

$$m = 1,\ A_0 = \frac{m\omega^2}{2},\ B_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}l(l+1),$$
$$a = 0,\ c = 1. \quad (26)$$

Тогда $Q = r$,

$$U(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2} - \frac{\hbar^2}{2mr^2}l(l+1). \quad (27)$$

Спектр этого потенциала имеет вид

$$E_{n,r} = \frac{\hbar\omega}{2}(4n + 2l + 3). \quad (28)$$

В теории линейного гармонического осциллятора величина n формулы (28) называется «радиальное квантовое число» обозначается n_r [3] .Перепишем (28) через n_r.

Главное квантовое число, пространственного осциллятора $N = 2n_r + l$.

Спектр энергии

Пространственного осциллятора принимает тогда вид

$$E_N = \hbar\omega\left(N + \frac{3}{2}\right), \quad (29)$$

что совпадает с результатами, полученными в [2], [3].

Заключение

Классы точных решений I, II содержит более 20 точно решаемых потенциалов. Причём не для всех этих потенциалов в литературе по квантовой механике известны точные решения. Хорошим примером является потенциал Вудса – Саксона, который описывает уровни энергии нейтрона в ядре атома [3]. Этот потенциал принадлежит к классу I [4]. Потенциалы, входящие в оба класса точно решаемых задач, описывают электромагнитное взаимодействие на атомно – молекулярном уровне и сильное взаимодействие на ядерном и кварковом уровне. С помощью описанного в статье метода могут быть найдены пока ещё неизвестные точные решения и для других потенциалов, входящих в классы I, II.

Список литературы

1. Infeld L., Hall T.E. The factorization method // Reviews of modern Physics. – 1954 – v. 23, № 1. – P. 21–69.

2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивисткая теория. – М.: ГИТТЛ, 1963. – С. 1–700.

3. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. – М: Мир, 1974. – С. 1–338.

4. Гришкан Ю.С., Усольцев О.А. Первый класс точно решаемых задач уравнений Шрёдингера квантовой механики. // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2016.